Известия вузов. Математика
2018, № 9, с. 81–96

http://kpfu.ru/science/nauchnye-izdaniya/ivrm/
e-mail: izvuz.matem@kpfu.ru

Е.И. ЯКОВЛЕВ, Д.Т. ЧЕКМАРЕВ

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ОДНОЙ ЧИСЛЕННОЙ СХЕМЕ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНЫХ СРЕД

Аннотация. Обсуждаются численные схемы решения задач механики сплошных сред методом конечных элементов. Ранее был разработан способ ускорения вычислений, состоящий в использовании симплициальной сетки, вписанной в исходное кубическое клеточное разбиение трехмерного тела. В данной работе показано, что препятствие к построению этой конструкции описывается в терминах групп гомологий по модулю два. Основная цель работы — разработка метода устранения этого препятствия. Достижение цели основано на эффективных алгоритмах для вычисления базисов групп гомологий, дуальных относительно формы пересечения.

Ключевые слова: вычислительная топология, полиэдр, клеточный комплекс, группа гомологий, многообразие, форма пересечения, механика сплошных сред, метод конечных элементов.

УДК: 514.86 : 515.146 : 519.63

Введение

В последние десятилетия вычислительная топология активно развивается и приобретает все большую значимость в приложениях. В частности, разработан ряд алгоритмов для эффективного вычисления групп гомологий, индексов пересечения циклов, поиска минимальных путей и циклов в заданных классах гомологий. В последней задаче применяются также расслоения с дискретными слоями [1].

К приложениям относятся, например, способы устранения топологических дефектов компьютерных моделей [2]–[4]. Топологические методы используются при моделировании сенсорных сетей. Для этого по областям покрытия сигнала из разных источников методом Чеха строится абстрактный симплициальный комплекс, а затем изучаются его группы гомологий [5], [6]. В работе [7] обсуждаются топологические характеристики случайных полей, используемые при численном моделировании нефтегазовых коллекторов.

В [8]–[10] предложена новая численная схема метода конечных элементов для решения трехмерных задач механики сплошных сред. Схема оказалась эффективной. Но авторы могли гарантировать ее реализуемость только в том случае, когда исследуемое трехмерное тело гомеоморфно шару [11]. Целью настоящей работы является расширение области применимости указанной схемы. Для ее достижения используются методы алгебраической и вычислительной топологии.

Поступила 14.07.2017

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 16-01-00312а, и Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ в 2018 г. (проект № 95).

1. Обозначения и термины

Исследуемая задача находится на стыке разных наук. В таких ситуациях зачастую возникает проблема корректного использования терминов, поскольку одни и те же объекты в этих науках называются и обозначаются по-разному. Поэтому целесообразно определиться с этими вопросами с самого начала.

Пусть $m, n \in \mathbb{N}$ и $n \leqslant m$. Любой компактный выпуклый многогранник $e^n \subset \mathbb{R}^m$ называется евклидовой клеткой. Клетка e^n имеет грани размерностей $0, 1, \ldots, n$. Если e^k — грань клетки e^n, то говорят, что они инцидентны. Евклидовы клетки $e^n, e^k \subset \mathbb{R}^m$ пересекаются правильно, если они не имеют общих точек или их пересечение $e^n \cap e^k$ представляет собой общую грань клеток e^n и e^k. Объединение P конечного набора правильно пересекающихся евклидовых клеток пространства $\mathbb{R}^m$ является компактным полиэдром. При этом набор всех клеток полиэдра P, включая все их грани, будем обозначать символом $K(P)$. Клетки размерности n из комплекса $K(P)$ образуют подмножество $K^n(P) \subset K(P)$. Объединение всех клеток из множеств $K^0(P), \ldots, K^n(P)$ называется n-мерным остовом полиэдра P и обозначается символом P^n. Всюду далее рассматриваются полиэдры с описанным евклидовым клеточным разбиением.

Наиболее часто используются клеточные комплексы $K(P)$, все элементы которых либо являются симплексами, либо комбинаторно эквивалентны кубам I^n, $I{=}[0,1]$, $n = 0, 1, \ldots, \dim P$. В первом случае соответствующее клеточное разбиение полиэдра P называется симплициальным или триангуляцией, а во втором называется кубическим.

В механике сплошных сред используются трехмерные полиэдры, клетки которых принято называть конечными элементами, а сам комплекс $K(P)$ — сеткой конечных элементов. При этом в симплициальном комплексе $K(P)$ симплексы старшей размерности являются тетраэдрами. Исходя из этого, сетку называют тетраэдрической. Если же используемый комплекс является кубическим, то трехмерные клетки представляют собой гексаэдры, соответственно сетка называется гексаэдрической.

Пусть Q — подполиэдр полиэдра P, представляющий собой объединение клеток некоторого подмножества $K' \subset K(P)$. Символами $C_n(P,Q)$, $Z_n(P,Q)$, $B_n(P,Q)$ и $H_n(P,Q)$ будут обозначаться группы n-мерных относительных цепей, циклов, границ и гомологий комплекса $K(P)$ с коэффициентами из поля $\mathbb{Z}_2$. При $K' = \varnothing$ подполиэдр Q также пуст. В этой ситуации $C_n(P,Q) = C_n(P)$, $Z_n(P,Q) = Z_n(P)$, $B_n(P,Q) = B_n(P)$ и $H_n(P,Q) = H_n(P)$ — группы абсолютных цепей, циклов, границ и гомологий. Для цепи $c \in C_n(P)$ символом $|c|$ обозначим ее тело. Кроме того, будем полагать $\overline{c} = c + C_n(Q)$. Таким образом, $\overline{c}$ — относительная цепь из группы $C_n(P,Q)$.

Предположим, что полиэдр P является n-мерным многообразием с краем ∂P. Очевидно, что край ∂P представляет собой подполиэдр полиэдра P, состоящий из всех $(n-1)$-мерных клеток комплекса $K(P)$, каждая из которых инцидентна точно одной клетке размерности n того же комплекса. Для $k \in \{0, 1, \ldots, n\}$ и $l = n - k$ определена билинейная форма пересечения $\mathrm{Ind} : H_k(P, \partial P) \times H_l(P) \to \mathbb{Z}_2$.

Пусть $H^l(P)$ — группа когомологий n-мерного многообразия P с коэффициентами из $\mathbb{Z}_2$. Тогда определен изоморфизм Лефшеца $\lambda : H^l(P) \to H_k(P, \partial P)$, $k + l = n$. При этом $\mathrm{Ind}(\lambda([J]), [y]) = J(y)$ для любых $[J] \in H^l(P)$ и $[y] \in H_l(P)$.

В случае, когда $\partial P = \varnothing$, λ превращается в изоморфизм Пуанкаре $\pi : H^l(P) \to H_k(P)$, для которого также верно равенство $\mathrm{Ind}(\pi([J]), [y]) = J(y)$ при всех $[J] \in H^l(P)$ и $[y] \in H_l(P)$.

Рассмотрим полиэдр P_0 и его клетку $e^{n-1} \in K^{n-1}(P_0)$. Если e^{n-1} инцидентна точно одной n-мерной клетке $e^n \in K^n(P_0)$, то удалим e^{n-1} и e^n из комплекса $K(P_0)$. Объединение оставшихся клеток обозначим символом P_1. Тогда говорят, что подполиэдр P_1 получен из

P_0 элементарным n-мерным коллапсированием. Композиция $P_0 \to P_s$ конечной последовательности элементарных n-мерных коллапсирований $P_{i-1} \to P_i$, $i = 1, \ldots, s$, называется коллапсированием полиэдра P в размерности n. Если n-мерное коллапсирование полиэдра P_s невозможно, то коллапсирование $P_0 \to P_s$ считается полным.

Очевидно, что для коллапсирования $P_0 \to P_s$ включение $\imath : P_s \to P_0$ является гомотопической эквивалентностью.

Если Q — подполиэдр полиэдра P, то в некоторых случаях будем использовать коллапсирования $P_0 \to P_s$, в процессе выполнения которых запрещается удалять клетки подкомплекса $K(Q) \subset K(P)$.

2. Постановка задачи

При численном решении трехмерных задач математической физики методом конечных элементов наиболее часто используются 4-узловые конечные элементы в форме тетраэдра с линейной интерполяцией функций в элементе и 8-узловые конечные элементы в форме гексаэдра с полилинейной интерполяцией функций. Те и другие имеют свои достоинства и недостатки. Отметим некоторые из них.

При одинаковом шаге сетки (линейном размере элементов) число тетраэдрических элементов примерно в 5–6 раз больше, чем гексаэдрических и в каждом внутреннем узле сетки сходится в среднем 20–24 тетраэдра или 8 гексаэдров. С другой стороны, по трудоемкости вычислений 8-узловой элемент значительно превосходит 4-узловой (8 точек численного интегрирования против одной). Так что в итоге вычислительные затраты получаются примерно равными. Компьютерная генерация тетраэдрических сеток существенно проще, чем гексаэдрических. Линейные 4-узловые элементы не обладают неустойчивостью типа “песочные часы” (hourglass instability [12]), свойственной схемам на гексаэдрических элементах с неполным интегрированием. С другой стороны, известен эффект медленной сходимости схем на базе тетраэдров, проявляющийся, в частности, при решении задач теории упругости [13].

В работах одного из авторов данной статьи и его коллег [8]–[10] была предложена “ажурная” численная схема метода конечных элементов для решения задач теории упругости и пластичности на базе гексаэдрических сеток в сочетании с 4-узловыми тетраэдрическими конечными элементами. В ней расчетные элементы заполняют область решения задачи не сплошь, а с регулярными промежутками между ними. Данная численная схема подробно исследована и обоснована в [14], показала свою высокую эффективность и быструю сходимость.

В качестве примера рассмотрим задачу о взаимодействии движущегося деформируемого трехмерного тела, называемого ударником, с неподвижной жесткой преградой [15]. В процессе решения на каждом шаге интегрирования по времени определяется геометрия деформированного тела (т. е. вычисляются координаты узлов сетки конечных элементов) и напряженно-деформированное состояние (компоненты тензоров напряжений и деформаций) в центрах конечных элементов.

Были выполнены сравнительные расчеты для модельной задачи. Использовались две численные схемы: схема на основе 8-узловых конечных элементов в виде гексаэдров, реализованная в вычислительном комплексе ANSYS, и ажурная схема [8]–[10]. Исходная сетка конечных элементов ударника содержит 2336 элементов в виде гексаэдров и 3261 узел. Особенностью данной сетки является ее нерегулярность. Такая ситуация является типичной при решении задач расчета на прочность тел сложной геометрической формы.

Расчеты проводились при заданной начальной (в момент столкновения) скорости ударника $v_0 = 0.1$ км/сек. Длина ударника составляла 19.2 см. Использовалась упругопластическая модель материала с линейным кинематическим упрочнением и следующими характеристиками материала: плотность $\rho = 7.8$ г/см^3, модуль Юнга $E = 200$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0.33$, предел текучести $\sigma_T = 0.23$ ГПа, модуль упрочнения $g = 0.63$ ГПа.

Задача решалась в геометрически нелинейной постановке в метрике текущего состояния. Проводилось сравнение компонент перемещений и скоростей перемещений на временном интервале (0, 100 мкс) в двух характерных точках ударника.

Результаты показали, что обе схемы имеют одинаковую точность решения, при этом ажурная схема примерно в два раза экономичнее традиционной по вычислительным затратам. Время расчета данной модельной задачи составило несколько минут на персональном компьютере в однопроцессорном режиме вычислений.

Следует отметить, что расчеты такого рода как для статических, так и для динамических задач широко распространены в конструкторских организациях при проектировании новой техники в машиностроении, авиационной и атомной отраслях. При этом для расчетов реальных конструкций используются сетки из миллионов и десятков миллионов конечных элементов. Решение таких задач требует значительных вычислительных затрат даже в режиме параллельных вычислений, расчет одного варианта на современной вычислительной технике может требовать нескольких часов и даже нескольких дней или недель. Поэтому проблема ускорения вычислений за счет использования новых более эффективных численных методов остается весьма актуальной.

В рассмотренном выше конкретном примере ударник был гомеоморфен шару. К сожалению, для тел со сложной топологией заданная гексаэдрическая сетка конечных элементов может оказаться такой, что применение ажурной схемы невозможно. В следующем разделе дадим строгое математическое описание препятствия к ее реализации и покажем, что оно всегда может быть устранено. Поэтому возникает следующая задача.

Даны произвольное трехмерное тело — подполиэдр $P \subset \mathbb{R}^3$, являющийся трехмерным многообразием с краем, и его кубическое клеточное разбиение (гексаэдрическая сетка конечных элементов). Требуется разработать комплекс алгоритмов, с помощью которого разбиение (сетку) можно скорректировать таким образом, чтобы для нового разбиения ажурная схема стала гарантированно реализуемой.

Решение сформулированной задачи является целью настоящей работы. Полученные результаты дадут возможность существенно расширить область применимости ажурной численной схемы метода конечных элементов.

3. Метод решения

Построение ажурной сетки на исходном кубическом комплексе $K(P)$ трехмерного тела $P \subset \mathbb{R}^3$ состоит в следующем. Вершины и ребра произвольной клетки (гексаэдра) $e^3 \in K^3(P)$ образуют его одномерный остов $(e^3)^1$, являющийся двудольным графом. Таким образом, множество вершин $K^0(e^3)$ распадается на две доли графа $(e^3)^1$, которые обозначим символами $V_+(e^3)$ и $V_-(e^3)$. Тетраэдр с вершинами из $V_+(e^3)$ обозначим символом $t(e^3)$. Очевидно, $t(e^3)$ может принимать два значения в зависимости от выбора доли V_+.

Пусть $e^3_1, e^3_2 \in K^3(P)$ и $e^3_1 \cap e^3_2 = e^k$, где $k \in \{0, 1, 2\}$. Будем считать выбор симплексов $t(e^3_1)$ и $t(e^3_2)$ согласованным, если $V_+(e^3_1) \cap K^0(e^k) = V_+(e^3_2) \cap K^0(e^k)$.

Впишем указанным способом тетраэдр $t(e^3)$ в каждую трехмерную клетку e^3 комплекса $K(P)$. Если удастся сделать это так, что для любых пересекающихся клеток $e^3_1, e^3_2 \in K^3(P)$

выбор симплексов $t(e_1^3)$ и $t(e_2^3)$ окажется согласованным, то набор всех вписанных тетраэдров и их граней образует симплициальный комплекс, который и назван авторами конструкции ажурной сеткой.

Из построения понятно, что согласованный выбор вписанных тетраэдров возможен тогда и только тогда, когда двудольным графом является весь одномерный остов P^1 полиэдра P [11]. При этом одну долю графа будут образовывать узлы ажурной сетки, а вторую — узлы исходной гексаэдрической сетки, не участвующие далее в расчетах.

В [11] также было отмечено, что указанное условие выполняется, если тело P гомеоморфно шару. В общем случае это неверно. Но замечательным фактом является то, что препятствие к возможности построения ажурной сетки на кубическом клеточном комплексе трехмерного тела может быть описано в терминах алгебраической топологии.

Заметим, что цепи $c \in C_n(P)$ можно рассматривать как наборы n-мерных клеток комплекса $K(P)$. Обозначим символом $\operatorname{card} c$ количество клеток, из которых состоит цепь c.

Предложение 1. *Формулы* $f(z) = \operatorname{card} z + 2\mathbb{Z}$ *и* $f_*([z]) = f(z)$ *определяют гомоморфизмы* $f : Z_1(P) \to \mathbb{Z}_2$ *и* $f_* : H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$.

Доказательство. Для $x, y \in Z_1(P)$ имеем $x + y = (x \cup y) \setminus (x \cap y)$ и потому $\operatorname{card}(x + y) = \operatorname{card} x + \operatorname{card} y - 2\operatorname{card}(x \cap y)$. Таким образом, $f : Z_1(P) \to \mathbb{Z}_2$ — гомоморфизм.

Пусть $z \in B_1(P)$. Тогда существует 2-цепь $c \in C_2(P)$, для которой $z = \partial c$. Но $c = e_1^2 + \cdots + e_s^2$, где e_i^2 — двумерные клетки. При этом $z = \partial e_1^2 + \cdots + \partial e_s^2$ и $f(z) = f(\partial e_1^2) + \cdots + f(\partial e_s^2)$. Поскольку двумерные клетки кубического комплекса являются четырехугольниками, то числа $\operatorname{card} \partial e_i^2$ четны для всех $i = 1, \ldots, s$. Следовательно, $f(z) = 0$.

Итак, $f(B_1(P)) = 0$ и потому f индуцирует гомоморфизм $f_* : H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$. □

Очевидно, гомоморфизм $f_* : H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$ может быть построен для любого евклидова клеточного разбиения полиэдра P, в котором каждая двумерная клетка имеет четное число одномерных граней. Также отметим, что f_* зависит от выбора клеточного разбиения $K(P)$ и, вообще говоря, меняется при его модификациях.

Согласно теории графов двудольность остова P^1 равносильна четности числа $\operatorname{card} z$ для всех $z \in Z_1(P)$. В силу предложения 1 это эквивалентно равенству $f_* = 0$. Таким образом, приходим к следующему выводу.

Предложение 2. *Для заданного кубического клеточного разбиения полиэдра* P *препятствием к возможности построения ажурной симплициальной сетки является фактор-группа* $H_1(P)/\ker f_*$.

Из предложения 2 следует, что построение ажурной сетки всегда возможно, если группа гомологий $H_1(P)$ тривиальна. При $H_1(P) \neq 0$ возникают две задачи:

- вычисление фактор-группы $H_1(P)/\ker f_*$,
- разработка методов устранения указанного препятствия.

Для решения первой задачи достаточно вычислить некоторый базис $[z_1], \ldots, [z_r]$ группы $H_1(P)$. Если $f_*([z_i] = f(z_i) = 1$ для всех $i = 1, \ldots, k$ и $f_*([z_j] = f(z_j) = 0$ для $j = k+1, \ldots, r$, то базис группы $H_1(P)/\ker f_*$ образуют смежные классы $[z_1] + \ker f_*, \ldots, [z_k] + \ker f_*$. Но для гарантированного построения ажурной сетки необходимо решить вторую проблему, которая значительно труднее.

Как уже отмечалось выше, в задачах механики сплошных сред полиэдр P является трехмерным телом в пространстве $\mathbb{R}^3$. С топологической точки зрения при этом P — компактное трехмерное многообразие с непустым краем ∂P. Наш метод основан на применении двойственности Лефшеца, согласно которой для многообразия P форма пересечения $\mathrm{Ind} : H_2(P, \partial P) \times H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$ невырождена. Отсюда следует существование базисов $[\overline{x}_1], \ldots, [\overline{x}_r]$ и $[y_1], \ldots, [y_r]$ групп $H_2(P, \partial P)$ и $H_1(P)$ соответственно, дуальных относительно формы Ind. Последнее означает, что $\mathrm{Ind}([\overline{x}_i], [y_j]) = \delta_{ij}$ для всех $i, j = 1, \ldots, r$, где δ_{ij} — символ Кронекера.

Допустим, что вычислили дуальные базисы $[\overline{x}_1], \ldots, [\overline{x}_r]$ и $[y_1], \ldots, [y_r]$ групп $H_2(P, \partial P)$ и $H_1(P)$, причем оказалось, что $[y_1] + \ker f_*, \ldots, [y_k] + \ker f_*$ — базис препятствия $H_1(P)/\ker f_*$ для некоторого $k \leq r$.

Выберем номер $i \in \{1, \ldots, k\}$. Разрежем P вдоль двумерной цепи x_i и немного отодвинем полученные цепи x_i^+ и x_i^- друг от друга так, чтобы $\overline{x}_i^+ \in Z_2(P, \partial P)$ и $\overline{x}_i^- \in Z_2(P, \partial P)$. При этом каждой вершине v цепи x_i будут соответствовать вершины v^+ и v^- цепей x_i^+ и x_i^- соответственно. Соединив вершины v^+ и v^- ребрами для всех $v \in K^0(x_i)$, получим новую кубическую сетку $K'(P)$.

Технические средства реализации описанной процедуры в рамках данной статьи обсуждать не будем. Здесь же отметим, что ее применение позволяет устранить препятствие к построению ажурной сетки, вписанной в исходное клеточное разбиение полиэдра P.

Действительно, рассмотрим тот же номер $i \in \{1, \ldots, k\}$. Без ограничения общности можно считать, что каждая компонента связности пересечения $y_i \cap x_i$ является вершиной, причем циклы y_i и x_i пересекаются в этой вершине трансверсально. Так как $\mathrm{Ind}([\overline{x}_i], [y_i]) = 1$, то число t точек пересечения цикла y_i и цепи x_i нечетно. Но эти точки пересечения являются вершинами цепи x_i, каждая из которых при построении комплекса $K'(P)$ превращается в две вершины, соединенные ребром. Следовательно, для соответствующего y_i цикла y_i' комплекса $K'(P)$ имеет место равенство $\mathrm{card}\, y_i' = \mathrm{card}\, y_i + t$. Так как $f_*([y_i]) = 1$, то число $\mathrm{card}\, y_i$ нечетно. Поэтому $\mathrm{card}\, y_i' \in 2\mathbb{Z}$ и $f_*'([y_i']) = 0$, где $f_*' : H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$ — построенный в предложении 1 гомоморфизм, соответствующий комплексу $K'(P)$.

Заметим, что для любого $j \neq i$ в силу равенства $\mathrm{Ind}([\overline{x}_i], [y_j]) = 0$ цикл y_j может трансверсально пересекать двумерную цепь x_i только четное число раз. Поэтому для соответствующего y_j цикла y_j' комплекса $K'(P)$ имеют место равенства $f'(y_j') = f(y_j)$ и $f_*'([y_j']) = f_*([y_j])$. Наконец, $[y_j'] = [y_j]$ в $H_1(P)$ для всех $j = 1, \ldots, r$.

Таким образом, описанное преобразование сетки уменьшает ранг препятствия на единицу. Поэтому, выполнив его для всех $i = 1, \ldots, k$, получим новое кубическое клеточное разбиение $\widehat{K}(P)$ полиэдра P, для которого соответствующий гомоморфизм $\widehat{f}_* : H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$ равен нулю. При этом $H_1(P)/\ker \widehat{f}_* = 0$.

Итак, проблема корректировки клеточного комплекса $K(P)$ для устранения препятствия к построению вписанной в него ажурной сетки сводится к разработке алгоритмов, позволяющих эффективно вычислить базисы групп $H_2(P, \partial P)$ и $H_1(P)$, дуальных относительно формы пересечения $\mathrm{Ind} : H_2(P, \partial P) \times H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$. Поэтому следующие разделы работы будут посвящены решению этой задачи вычислительной топологии.

4. Вычисление двумерных относительных гомологий

Сначала обсудим проблему эффективного вычисления базиса группы $H_2(P, \partial P)$. Согласно теории $H_2(P, \partial P) \cong H_2(P \cup \mathrm{con}\, \partial P)$, где $\mathrm{con}\, \partial P$ — конус над ∂P. Таким образом, задача сводится к нахождению базиса группы абсолютных гомологий. Для абсолютных гомологий имеется стандартный метод, основанный на приведении матриц инциденций к нормальной диагональной форме [16].

Но непосредственное использование этой известной схемы на практике не рационально. И дело не в том, что полиэдр $P \cup \operatorname{con} \partial P$ не может быть построен в трехмерном пространстве. С точки зрения теории гомологий важна симплициальная схема, а не ее реализация. Так что вычисления на схеме полиэдра $P \cup \operatorname{con} \partial P$, не вложимого в то пространство, в котором находится само многообразие P, вполне осуществимы. Только комплексы $K(P)$ и $K(\partial P)$ могут содержать большое число клеток. Добавление конуса $\operatorname{con} \partial P$ значительно увеличит их количество. Поэтому придется приводить к нужному виду матрицы больших размеров, что противоречит заявленной цели ускорения вычислений.

Наша идея состоит в достижении цели посредством решения последовательности существенно более простых (с вычислительной точки зрения) задач. Но для ее реализации требуется теоретическое обоснование.

Предложение 3. *Пусть $n \geq 2$, P — компактное и связное n-мерное многообразие с краем, $K(P)$ — его клеточный комплекс, $e^n \in K^n(P)$ и $P_1 = P \setminus \operatorname{Int} e^n$. Тогда включение $\imath_1 : P_1 \to P$ индуцирует изоморфизм $\imath_{1*} : H_{n-1}(P_1, \partial P) \to H_{n-1}(P, \partial P)$.*

Доказательство. Рассмотрим пару триад (P, P_1, e^n) и $(\partial P, \partial P, \varnothing)$. Поскольку $P_1 \cap e^n = \partial e^n$ и $\partial P \cap \varnothing = \varnothing$, то для нее точна последовательность Майера–Виеториса ([17], гл. 3, п. 8)

$$\cdots \to H_n(P_1, \partial P) \times H_n(e^n, \varnothing) \xrightarrow{j_*^n} H_n(P, \partial P) \xrightarrow{\Delta_*^n} H_{n-1}(\partial e^n, \varnothing) \xrightarrow{i_*^{n-1}}$$
$$\xrightarrow{i_*^{n-1}} H_{n-1}(P_1, \partial P) \times H_{n-1}(e^n, \varnothing) \xrightarrow{j_*^{n-1}} H_{n-1}(P, \partial P) \xrightarrow{\Delta_*^{n-1}} H_{n-2}(\partial e^n, \varnothing) \to \cdots . \quad (1)$$

Если $P = e^n$, то в P_1 нет n-мерных клеток. При $P \neq e^n$ имеем $\partial P_1 = \partial P \cup \partial e^n \neq \partial P$ и потому $Z_n(P_1, \partial P) = 0$. В любом случае $H_n(P_1, \partial P) = 0$.

Очевидно, что $H_n(e^n, \varnothing) = H_{n-1}(e^n, \varnothing) = 0$ всегда и $H_{n-2}(\partial e^n, \varnothing) = 0$ для $n > 2$. Но при $n = 2$ имеем $\operatorname{im} \Delta_*^{n-1} = \ker i_*^{n-2} = 0$.

Наконец, $H_{n-1}(\partial e^n, \varnothing) \cong \mathbb{Z}_2$ и $H_n(P, \partial P) \cong \mathbb{Z}_2$. В результате последовательность (1) приобретает вид:

$$0 \to \mathbb{Z}_2 \xrightarrow{\Delta_*^n} \mathbb{Z}_2 \xrightarrow{i_*^{n-1}} H_{n-1}(P_1, \partial P) \times 0 \xrightarrow{j_*^{n-1}} H_{n-1}(P, \partial P) \to 0.$$

Но тогда Δ_*^n — мономорфизм и как следствие этого изоморфизм. Поэтому $i_*^{n-1} = 0$ и j_*^{n-1} — изоморфизм. Осталось заметить, что $j_*^{n-1}([\overline{x}]_1, 0) = [\overline{x}] = \imath_{1*}([\overline{x}]_1)$ для любого элемента $[\overline{x}]_1 \in H_{n-1}(P_1, \partial P)$. □

Предложение 4. *Рассмотрим полиэдр P_1 из предложения 3. Выполним его полное n-мерное коллапсирование без удаления клеток подполиэдра $\partial P \subset P_1$. Тогда полученный подполиэдр $P_2 \subset P_1$ имеет размерность $n - 1$.*

Доказательство. Допустим, что утверждение неверно, т. е. $K^n(P_2) \neq \varnothing$. Выберем клетку $e_*^n \in K^n(P_2)$ и положим $K_-^n(P_1) = K^n(P_1) \setminus K^n(P_2)$.

По построению $P_1 = P \setminus \operatorname{Int} e^n$, где P — связное и потому сильно связное n-мерное многообразие. Но тогда в P существует n-мерный путь $X = \{e_0^n, \ldots, e_m^n\}$ с началом $e_0^n = e^n$ и концом $e_m^n = e_*^n$.

Очевидно, $e_i^n \in K^n(P_1)$ для всех $i = 1, \ldots, m$ и $e_1^n \in K_-^n(P_1)$. Поэтому найдется наибольший номер $k \in \{1, \ldots, m\}$, для которого $e_k^n \in K_-^n(P_1)$. Так как $e_m^n \in K^n(P_2)$, то $k < m$. При этом $e_{k+1}^n \in K^n(P_2)$.

Рассмотрим $(n-1)$-мерную клетку $e_k^{n-1} = e_k^n \cap e_{k+1}^n$. Так как она инцидентна двум клеткам e_k^n и e_{k+1}^n, то не может принадлежать краю ∂P. Поскольку P — многообразие, то других инцидентных ей n-мерных клеток в P_1 быть не может. Таким образом, после удаления в процессе коллапсирования клетки e_k^n ее грань e_k^{n-1} будет инцидентна ровно одной n-мерной клетке e_{k+1}^n. Следовательно, ничто не мешает выполнить элементарное коллапсирование через грань e_k^{n-1}. Но оно приведет к удалению клетки e_{k+1}^n, что противоречит включению $e_{k+1}^n \in K^n(P_2)$. □

Предложение 5. *Пусть P — компактный и связный k-мерный полиэдр, P_0 — его подполиэдр, Q — объединение всех k-мерных клеток полиэдра P, не лежащих в P_0, и $Q_0 = Q \cap P_0$. Тогда включение $\imath : Q \to P$ индуцирует изоморфизм $\imath_* : H_k(Q, Q_0) \to H_k(P, P_0)$.*

Доказательство. Положим $P' = Q \cup P_0$. Так как $Q_0 \cup P_0 = P_0$, то тройки (P', Q, P_0) и (P_0, Q_0, P_0) образуют пару триад. Поскольку $Q \cap P_0 = Q_0$ и $Q_0 \cap P_0 = Q_0$, то точна последовательность

$$\cdots \to H_k(Q_0, Q_0) \xrightarrow{i_*} H_k(Q, Q_0) \times H_k(P_0, P_0) \xrightarrow{j_*} H_k(P', P_0) \xrightarrow{\Delta_*} H_{k-1}(Q_0, Q_0) \to \cdots .$$

Очевидно, $H_k(Q_0, Q_0) = H_{k-1}(Q_0, Q_0) = 0$. Следовательно, j_* — изоморфизм. Пусть $\imath' : Q \to P'$ — включение. Тогда в силу равенства $H_k(P_0, P_0) = 0$ имеем

$$j_*([\overline{x}], 0) = [\overline{x}]' = \imath'_*([\overline{x}])$$

для всех $[\overline{x}] \in H_k(Q, Q_0)$. Таким образом, $\imath'_* : H_k(Q, Q_0) \to H_k(P', P_0)$ — изоморфизм.

С другой стороны, $C_k(P', P_0) = C_k(P, P_0)$ и $C_{k-1}(P', P_0) \subset C_{k-1}(P, P_0)$. Следовательно, $H_k(P', P_0) = Z_k(P', P_0) = Z_k(P, P_0) = H_k(P, P_0)$ и $\imath'_* = \imath_*$. □

Алгоритм 1. Пусть P — компактное и связное n-мерное многообразие с краем ∂P, $n \geq 2$. Выполним следующие действия.

1) Из комплекса $K(P)$ удалим произвольную n-мерную клетку e^n. Объединение оставшихся клеток обозначим P_1. Тогда $P_1 = P \setminus \operatorname{Int} e^n$.
2) Выполним полное n-мерное коллапсирование $P_1 \to P_2$, не затрагивающее клеток из ∂P. Согласно предложению 4 получим подполиэдр $P_2 \subset P_1$ размерности $n-1$.
3) Выполним полное $(n-1)$-мерное коллапсирование $P_2 \to P_3$, не затрагивающее клеток из ∂P.
4) Объединив все $(n-1)$-мерные клетки из $K(P_3) \setminus K(\partial P)$ получим подполиэдр $Q \subset P_3$. Положим $\partial Q = Q \cap \partial P$.
5) Положим $\widehat{Q} = Q \cup \operatorname{con} \partial Q$, где $\operatorname{con} \partial Q$ — конус над ∂Q.

Теорема 1. *Включения $\imath : Q \to P$ и $\widehat{\imath} : Q \to \widehat{Q}$ индуцируют изоморфизмы $\imath_* : H_{n-1}(Q, \partial Q) \to H_{n-1}(P, \partial P)$ и $\widehat{\imath}_* : H_{n-1}(Q, \partial Q) \to Z_{n-1}(\widehat{Q})$.*

Доказательство. Положим $P_0 = P$, $P_4 = Q$, $P'_k = \partial P$ для $k = 1, 2, 3$ и $P'_4 = \partial Q$. Если $\imath_k : P_k \to P_{k-1}$ — включения, то $\imath_k(P'_k) \subset P'_{k-1}$ для всех $k = 1, 2, 3, 4$. Поэтому определены индуцированные гомоморфизмы $\imath_{k*} : H_{n-1}(P_k, P'_k) \to H_{n-1}(P_{k-1}, P'_{k-1})$.

Включения $\imath_2$ и $\imath_3$ являются гомотопическими эквивалентностями, индуцирующими тождественные отображения на $P'_2 = P'_1$ и $P'_3 = P'_2$ соответственно. Это означает, что $\imath_{2*}$ и $\imath_{3*}$ — изоморфизмы. Отображения $\imath_{1*}$ и $\imath_{4*}$ являются изоморфизмами согласно предложениям 3 и 5. Но $\imath = \imath_1 \circ \imath_2 \circ \imath_3 \circ \imath_4$ и, следовательно, $\imath_* = \imath_{1*} \circ \imath_{2*} \circ \imath_{3*} \circ \imath_{4*}$. Этим первое утвержение доказано.

Так как $\dim \widehat{Q} = n - 1$, то $H_{n-1}(\widehat{Q}) = Z_{n-1}(\widehat{Q})$. Поэтому второе утверждение немедленно вытекает из теоремы 4 из ([18], гл. 1, п. 5). □

Согласно доказанной теореме алгоритм 1 позволяет свести вычисление базиса группы относительных гомологий $H_{n-1}(P, \partial P)$ для n-мерного многообразия P к вычислению базиса группы абсолютных циклов некоторого $(n-1)$-мерного полиэдра $\widehat{Q}$. Таким образом, достигается двойной эффект: во-первых, понижается размерность, а во-вторых, группа гомологий заменяется группой циклов. Это существенно облегчает и ускоряет решение задачи.

В случае $n = 3$ полиэдр $\widehat{Q}$ оказывается двумерным. Для эффективного вычисления группы 2-циклов двумерного полиэдра можно применить следующий алгоритм.

Алгоритм 2. Пусть Q — компактный 2-мерный полиэдр. Выполним следующие операции.

1) Составим список W ребер ветвления полиэдра Q. Положим $i := 0$.
2) Пока список $K^2(Q)$ не станет пустым будем выполнять следующие действия:
   — положим $i := i+1$, из списка $K^2(P)$ выберем и удалим произвольную 2-мерную клетку e_0^2, создадим цепи $E_i := e_0^2$ и $D_i := \partial e_0^2$,
   — выполним полное 2-мерное коллапсирование полиэдра Q, не затрагивающее ребер из W, прибавим каждую удаляемую 2-мерную клетку e^2 к цепи E_i, а ее границу ∂e^2 — к цепи D_i.
3) После предыдущего шага получим одномерный подполиэдр $Q' \subset Q^1$. Найдем его компоненты связности $Q'_1, \dots, Q'_l$. В каждой компоненте Q'_t, $t = 1, \dots, l$, выберем произвольную вершину $v_t \in K^0(Q'_t)$, начиная с нее построим максимальное дерево $V_t \subset Q'_t$ и найдем список перемычек $S_t = K^1(Q'_t) \setminus K^1(V_t)$. Положим $S = S_1 \cup \dots \cup S_l$.
4) Пусть $S = \{s_1, \dots, s_\alpha\}$, а $D_1, \dots, D_\beta$ — все одномерные цепи, построенные на втором шаге алгоритма. Составим матрицу A из α строк и β столбцов, полагая $a_{ij} = 1$ при $s_i \in D_j$ и $a_{ij} = 0$ при $s_i \notin D_j$.
5) Найдем фундаментальную систему решений $X_1, \dots, X_r$ системы линейных уравнений $AX = 0$, где X — столбец из β неизвестных, являющихся элементами группы $\mathbb{Z}_2$.
6) Для каждого $k = 1, \dots, r$ положим $x_k = \sum\limits_{j=1}^{\beta} X_k^j E_j$.

Теорема 2. *Для любого компактного двумерного полиэдра Q найденные с помощью алгоритма 2 циклы $x_1, \dots, x_r$ образуют базис группы $Z_2(Q) = H_2(Q)$.*

Доказательство. В результате первых двух шагов алгоритма получим новое клеточное разбиение полиэдра Q, в котором замкнутые клетки размерностей нуль и один совпадают с принадлежащими Q' клетками исходного разбиения, а замкнутыми двумерными клетками являются тела $|E_k|$ цепей E_k, $k = 1, \dots, \beta$ ([19], гл. 6). Это разбиение уже не является евклидовым в смысле определения из раздела 1, что не мешает использовать его для вычисления базисных циклов.

Обозначим символами $C'_m(Q)$ и $Z'_m(Q)$ группы цепей и циклов построенного клеточного разбиения, а символами $\partial'_m : C'_m(Q) \to C'_{m-1}(Q)$ — соответствующие граничные гомоморфизмы.Так как Q' — одномерный остов нового разбиения, то $C'_1(Q) = C_1(Q')$ и $Z'_1(Q) = Z_1(Q')$.

Из теории графов известно ([20], гл. 10), что соединив концы каждой перемычки $s_i \in S$, $i = 1, \dots, \alpha$, с начальной вершиной v_t, содержащей s_i компоненты связности Q'_t графа Q' путями в соответствующем дереве V_t, можно построить базис $z_1, \dots, z_\alpha$ группы $Z_1(Q')$. При этом каждый цикл z_i содержит точно одну перемычку s_i. Следовательно, построенная на шаге 4 матрица A представляет собой матрицу гомоморфизма $\partial_2'^0 : C'_2(Q) \to Z'_1(Q)$. Но тогда циклы $x'_k = \sum\limits_{j=1}^{\beta} X_k^j |E_j|$, $k = 1, \dots, r$, образуют базис группы $\ker \partial_2'^0$.

Граничный гомоморфизм $\partial_2' : C_2'(Q) \to C_1'(Q)$ удовлетворяет равенству $\partial_2' = \imath_0 \circ \partial_2'^0$, где $\imath_0 : Z_1'(Q) \to C_1'(Q)$ — включение. Поэтому $\ker \partial_2'^0 = Z_2'(Q)$. Так как группы гомологий не зависят от клеточного разбиения, то $Z_2'(Q) = H_2'(Q) \cong H_2(Q) = Z_2(Q)$, причем изоморфизм $h : Z_2'(Q) \to Z_2(Q)$ задается равенством

$$h\bigg(\sum_{i=1}^{\beta} \lambda^i |E_i|\bigg) = \sum_{i=1}^{\beta} \lambda^i E_i.$$

Следовательно, $x_1 = h(x_1'), \ldots, x_r = h(x_r')$ — базис группы $Z_2(Q)$. □

Оценим асимптотическую эффективность предложенной схемы вычисления базиса группы $H_2(P, \partial P)$. Пусть P — компактное трехмерное подмногообразие пространства $\mathbb{R}^3$, $K(P)$ — его кубический клеточный комплекс, $p = \operatorname{card} K^3(P)$ и $q = \operatorname{card} K^2(\partial P)$. После завершения работы алгоритма 1 получим двумерный полиэдр $\widehat{Q}$. Положим $\widehat{q} = \operatorname{card} \widehat{Q}$.

Всюду будем предполагать, что, кроме списков клеток всех размерностей самого полиэдра, для каждой i-мерной клетки известен список инцидентных ей клеток размерности $i+1$.

Очевидно, первый шаг рассматриваемого алгоритма на его сложность не влияет. Поскольку $\operatorname{card} K^2(P) \le 6p$ и $\operatorname{card} K^1(P) \le 8p$, то для выполнения следующих двух шагов требуется $O(p)$ элементарных операций. Для четвертого шага понадобится $O(\widehat{q}q)$ действий, для последнего — заведомо меньше. Таким образом, вычислительная сложность всего алгоритма равна $O(p + \widehat{q}q)$ в худшем случае.

Алгоритм 2 будет применяться уже к двумерному полиэдру $\widehat{Q}$. Пусть $\gamma = \max\{\alpha, \beta\}$. Тогда для выполнения первых трех шагов алгоритма будет нужно $O(\widehat{q})$ элементарных действий, а для остальных — соответственно $O(\gamma^2)$, $O(\gamma^3)$ и $O(r\gamma)$. Так как $r \le \gamma$, то получается, что алгоритм имеет вычислительную сложность $O(\widehat{q} + \gamma^3)$.

Итак, оценка эффективности содержит многочлен степени 3. Если учесть, что стандартный алгоритм вычисления базиса группы $H_2(P \cup \operatorname{con} \partial P)$ имеет сложность $O((p+q)^3)$, то чисто формально наш подход не является принципиально лучшим. Но параметр γ как правило во много раз меньше числа исходных клеток p. Поэтому в реальных вычислениях экономия времени оказывается существенной.

Имеются алгоритмы, позволяющие вычислять базис группы $Z_2(Q) = H_2(Q)$ двумерного полиэдра Q без применения каких бы то ни было матриц [19], [21]. Их применение позволило бы уменьшить сложность вычислений на порядок. Но указанные алгоритмы опираются на теорему Александера–Понтрягина и потому их корректность гарантируется только в том случае, когда Q является подполиэдром пространства $\mathbb{R}^3$. Полиэдр $\widehat{Q}$, полученный после применения алгоритма 1 к трехмерному многообразию P, может и не обладать указанным свойством.

5. Вычисление одномерных гомологий

Здесь будет разработан эффективный метод построения базиса группы абсолютных одномерных гомологий компактного трехмерного подмногообразия $P \subset \mathbb{R}^3$, дуального к уже имеющемуся базису группы $H_2(P, \partial P)$. Оказывается, что сначала можно найти некоторый базис группы $H_1(\partial P)$, а затем преобразовать его так, чтобы в нем содержался искомый базис группы $H_1(P)$. Тем самым снова удается уменьшить размерность задачи, что позволяет ускорить вычисления.

Пусть P — компактное n-мерное подмногообразие пространства $\mathbb{R}^n$. Тогда $\partial P \neq \varnothing$ и точна гомологическая последовательность

$$\cdots \to H_{k+1}(P) \xrightarrow{j_*^{k+1}} H_{k+1}(P, \partial P) \xrightarrow{\partial_*^{k+1}} H_k(\partial P) \xrightarrow{i_*^k} H_k(P) \xrightarrow{j_*^k} H_k(P, \partial P) \to \cdots . \tag{2}$$

Предложение 6. *В последовательности* (2) $j_*^k = 0$ *для всех* $k = 1, \ldots, n$.

Доказательство. При $k = n$ утверждение очевидно, так как $H^n(P) = 0$. Далее будем считать, что $k < n$.

Построим евклидовы клеточные разбиения пространства $\mathbb{R}^n$ и его подмногообразия P так, чтобы на P они совпадали. При этом $K(P)$ — подкомплекс клеточного комплекса $K(\mathbb{R}^n)$. Положим $R = \mathbb{R}^n \setminus \operatorname{Int} P$.

Пусть $[y] \in H_k(P)$. Так как пространство $\mathbb{R}^n$ стягиваемо, то найдется цепь $c \in C_{k+1}(\mathbb{R}^n)$, для которой $\partial c = y$. Положим $c_P = c \cap K^k(P)$, $c_R = c \cap K^k(R)$ и $z = \partial c_R$.

По построению $z \in Z_k(R)$. С другой стороны, $c_R = c + c_P$ и потому $z = \partial c + \partial c_P = y + \partial c_P \in Z_k(P)$. Следовательно, $z \in Z_k(\partial P)$ и относительный цикл $\overline{z} = z + C_k(\partial P)$ равен нулю в $Z_k(P, \partial P)$. Кроме того, равенство $z = y + \partial c_P$ означает, что $[y] = [z]$ в $H_k(P)$. Но тогда $j_*^k([y]) = j_*^k([z]) = [\overline{z}] = 0$. $\square$

Следствие 1. В (2) ∂_*^{k+1} — мономорфизм и включение $\imath_\partial : \operatorname{im} \partial_*^{k+1} \to H_k(\partial P)$ вместе с гомоморфизмом i_*^k образуют короткую точную последовательность

$$0 \to \operatorname{im} \partial_*^{k+1} \xrightarrow{\imath_\partial} H_k(\partial P) \xrightarrow{i_*^k} H_k(P) \to 0.$$

Следствие 2. Если $[\overline{x}_1], \ldots, [\overline{x}_r]$ — базис группы $H_{k+1}(P, \partial P)$, то гомологические классы циклов $\partial x_1, \ldots, \partial x_r$ образуют базис подгруппы $\operatorname{im} \partial_*^{k+1} \subset H_k(\partial P)$. При этом точна последовательность

$$0 \to \langle [\partial x_1], \ldots, [\partial x_r] \rangle \xrightarrow{\imath_\partial} H_k(\partial P) \xrightarrow{i_*^k} H_k(P) \to 0.$$

Предложение 7. *Пусть P — компактное n-мерное подмногообразие пространства $\mathbb{R}^n$, $\operatorname{Ind}_0 : H_{n-2}(\partial P) \times H_1(\partial P) \to \mathbb{Z}_2$ — форма пересечения для края ∂P, $[\overline{x}_1], \ldots, [\overline{x}_r]$ — базис группы $H_{n-1}(P, \partial P)$, $[z]_{\partial P}$ — произвольный элемент группы $H_1(\partial P)$ и $[z]_P = \imath_*^1([z]_{\partial P}) \in H_1(P)$. Тогда $[z]_P = 0$ в том и только том случае, если для всех $j = 1, \ldots, r$ имеет место равенство $\operatorname{Ind}_0([\partial x_j]_{\partial P}, [z]_{\partial P}) = 0$.*

Доказательство. Согласно предложению 9.1 из ([17], гл. VIII) коммутативна диаграмма

$$\begin{array}{ccc} H^1(P) & \xrightarrow{\imath^*} & H^1(\partial P) \\ \lambda \big\downarrow & & \big\downarrow \pi \\ H_{n-1}(P, \partial P) & \xrightarrow{\partial_*} & H_{n-2}(\partial P), \end{array} \tag{3}$$

в которой ∂_* и $\imath^*$ гомоморфизмы из гомологической и когомологической последовательностей пары $(P, \partial P)$, λ — изоморфизм Лефшеца, а π — изоморфизм Пуанкаре.

Пусть $\operatorname{Ind} : H_{n-1}(P, \partial P) \times H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$ — форма пересечения для P и $[\alpha] = \lambda^{-1}([\overline{x}_j])$. Тогда $\operatorname{Ind}([\overline{x}_j], [z]_P) = \alpha(z)$. С другой стороны, $\imath^*([\alpha]) = [\alpha|_{\partial P}] \in H^1(\partial P)$ и в силу (3) $\pi([\alpha|_{\partial P}]) = \pi \circ \imath^*([\alpha]) = \partial_*([\overline{x}_j]) = [\partial x_j]_{\partial P}$. Поэтому $\operatorname{Ind}_0([\partial x_j]_{\partial P}, [z]_{\partial P}) = \alpha|_{\partial P}(z) = \alpha(z)$. Таким образом,

$$\operatorname{Ind}_0([\partial x_j]_{\partial P}, [z]_{\partial P}) = \operatorname{Ind}([\overline{x}_j], [z]_P). \tag{4}$$

Согласно теореме двойственности Лефшеца ([22], V. 3) форма пересечения Ind невырождена. Следовательно, $\operatorname{Ind}([\overline{x}_j], [z]_P) = 0$ для всех $j = 1, \ldots, r$ тогда и только тогда, когда $[z]_P = 0$ в $H_1(P)$. Но в силу (4) это равносильно доказываемому утверждению. $\square$

Полученные результаты показывают, что для вычисления базиса группы $H_1(P)$ многообразия с краем можно использовать базис группы $H_1(\partial P)$. При $\dim P = 3$ последний может быть эффективно найден с помощью следующего алгоритма.

Алгоритм 3. Пусть Q — замкнутое двумерное многообразие, вообще говоря, не являющееся связным. Выполним следующие действия.

1) Найдем компоненты связности $Q_1, \dots, Q_m$ полиэдра Q.
2) Для каждого $k = 1, \dots, m$ выполним следующие процедуры:
   — из комплекса $K(Q_k)$ удалим произвольную двумерную клетку e_k^2, объединение оставшихся клеток обозначим Q'_k;
   — выполним полное двумерное коллапсирование $Q'_k \to G_k$, в результате получим одномерный подполиэдр (граф) $G_k \subset Q'_k$;
   — с помощью стандартных алгоритмов построим набор Y_k фундаментальных циклов графа G_k;
3) положим $Y = Y_1 \cup \dots \cup Y_m$.

Теорема 3. *Если $Y = y_1, \dots, y_s$, то гомологические классы $[y_1]_Q, \dots, [y_s]_Q$ образуют базис группы $H_1(Q)$.*

Доказательство. Применим предложение 3 к случаю $P = Q_k$ и $\partial P = \varnothing$. Тогда согласно его утверждению включение $\imath'_k : Q'_k \to Q_k$ индуцирует изоморфизм $\imath'_{k*} : H_1(Q'_k) \to H_1(Q_k)$. Поскольку включение $\imath_k : G_k \to Q'_k$ является гомотопической эквивалентностью, то индуцированный им гомоморфизм $\imath_{k*} : H_1(G_k) \to H_1(Q'_k)$ также биективен.

По предложению 4 $\dim G_k = 1$. Следовательно, циклы из списка Y_k могут быть найдены методами теории графов.

Если $G = G_1 \cup \dots \cup G_m$, то согласно доказанному выше включение $\imath : G \to Q$ индуцирует изоморфизм $\imath_* : H_1(G) \to H_1(Q)$. Осталось заметить, что $\imath_*(y_j) = [y_j]_Q$ для всех $j = 1, \dots, s$. □

По предложению 7 для того, чтобы из базиса группы $H_1(\partial P)$ получить базис группы $H_1(P)$, необходимо уметь вычислять индексы пересечения одномерных циклов края ∂P. Эту задачу можно эффективно решить с помощью следующего алгоритма.

Алгоритм 4. Пусть Q — замкнутое двумерное многообразие и $x, y \in Z_1(Q)$. Выполним следующие действия.

1) Представим цикл y в виде $y = [v_0 v_1] + \dots + [v_{m-1} v_m]$, где $v_m = v_0$.
2) Для каждого $k = 1, \dots, m$ выберем двумерную клетку $e_k^2 \in K(Q)$, инцидентную ребру $[v_{k-1} v_k]$. Положим $e_{m+1}^2 = e_1^2$.
3) Для каждого $k = 1, \dots, m$ построим двумерный путь Y_k в звезде $St(v_k, Q)$, соединяющий клетки e_k^2 и e_{k+1}^2.
4) Из клеток путей Y_k, $k = 1, ..., m$, составим замкнутый двумерный путь $Y = \{\varepsilon_1^2, ..., \varepsilon_n^2\}$.
5) Положим $\varepsilon_{n+1}^2 = \varepsilon_1^2$ и $b_j = \varepsilon_j^2 \cap \varepsilon_{j+1}^2$ для всех $j = 1, \dots, n$.
6) Полагая сначала $J_y(a) := 0$ для всех ребер $a \in K^1(Q)$, а затем $J_y(b_j) := J_y(b_j) + 1$ для всех $j = 1, \dots, n$, построим коцепь $J_y : K^1(Q) \to \mathbb{Z}_2$.
7) Если $x = \sum\limits_{i=1}^{s} a_i$, то положим $J_y(x) = \sum_{i=1}^{s} J_y(a_i)$.

Отметим, что операции сложения на последних двух шагах алгоритма должны выполняться во модулю 2.

Теорема 4. *Для любых циклов $x, y \in Z_1(Q)$ их гомологические классы $[x], [y] \in H_1(Q)$ удовлетворяют равенству $\mathrm{Ind}_Q([x],[y]) = J_y(x)$, где $\mathrm{Ind}_Q : H_1(Q) \times H_1(Q) \to \mathbb{Z}_2$ — форма пересечения многообразия Q.*

Доказательство. Так как Y — замкнутый двумерный путь, то цепь $y^* = \sum\limits_{j=1}^{n} b_j^*$, где b_j^* — барицентрическая звезда ребра b_j, является циклом, гомологичным циклу y (в барицентрическом подразделении комплекса $K(Q)$). Следовательно, $\mathrm{Ind}_Q([x],[y]) = \mathrm{Ind}_Q([x],[y^*])$.

С другой стороны, J_y — коцикл и по построению его когомологический класс $[J_y] \in H^1(Q)$ удовлетворяет равенству $\pi([J_y]) = [y^*]$, где $\pi : H^1(Q) \to H_1(Q)$ — изоморфизм Пуанкаре. Поэтому $\mathrm{Ind}_Q([x],[y^*]) = J_y(x)$ для любого $[x] \in H_1(Q)$. □

Вернемся к исходной задаче — вычислению для трехмерного подмногообразия $P \subset \mathbb{R}^3$ дуальных базисов групп $H_2(P, \partial P)$ и $H_1(P)$. Для достижения этой цели предлагается следующий алгоритм.

Алгоритм 5. Пусть P — компактное трехмерное подмногообразие пространства $\mathbb{R}^3$. Выполним следующие действия.

1) Применяя алгоритмы 1 и 2, построим базис $[\overline{x}_1], \dots, [\overline{x}_r]$ группы $H_2(P, \partial P)$.
2) Воспользовавшись алгоритмом 3, найдем базис $[y_1]_{\partial P}, \dots, [y_{2r}]_{\partial P}$ группы $H_1(\partial P)$.
3) С помощью алгоритма 4 вычислим индексы пересечения $a_{ij} = \mathrm{Ind}_0([\partial x_i]_{\partial P}, [y_j]_{\partial P})$, где $[\partial x_i]_{\partial P} = \partial_*([\overline{x}_i]) \in H_1(\partial P)$, для всех $i = 1, \dots, r$ и $j = 1, \dots, 2r$. Составим матрицу A из r строк и $2r$ столбцов с элементами a_{ij}.
4) Складывая и переставляя столбцы матрицы A, приведем ее к виду $A^0 = (EO)$, где E — единичная матрица порядка r, а O — нулевая матрица того же порядка. Все действия со столбцами матрицы A повторим с элементами списка $y_1, \dots, y_{2r}$. В результате получим новый набор циклов $y_1^0, \dots, y_{2r}^0$, порождающий базис $[y_1^0]_{\partial P}, \dots, [y_{2r}^0]_{\partial P}$ группы $H_1(\partial P)$.

Теорема 5. *Если $y_1^0, \dots, y_{2r}^0$ — список циклов, полученный в результате работы алгоритма 5, то гомологические классы $[y_1^0]_P, \dots, [y_r^0]_P$ образуют базис группы $H_1(P)$, дуальный построенному на первом шаге базису $[\overline{x}_1], \dots, [\overline{x}_r]$ группы $H_2(P, \partial P)$.*

Доказательство. По построению $H_1(\partial P) = \langle [y_1^0]_{\partial P}, \dots, [y_{2r}^0]_{\partial P} \rangle$. Согласно виду матрицы A^0 имеем

$$\mathrm{Ind}_0([\partial x_i]_{\partial P}, [y_j^0]_{\partial P}) = \delta_{ij} \quad \text{и} \quad \mathrm{Ind}_0([\partial x_i]_{\partial P}, [y_{r+j}^0]_{\partial P}) = 0 \quad \text{для всех} \quad j = 1, \dots, r, \tag{5}$$

где δ_{ij} — символ Кронекера. По предложению 7 отсюда следует, что гомоморфизм $\imath_*^1$ из последовательности (2) имеет ядро $\ker \imath_*^1 = \langle [y_{r+1}^0]_{\partial P}, \dots, [y_{2r}^0]_{\partial P} \rangle$. Таким образом, фактор-группа $H_1(\partial P)/\ker \imath_*^1$ имеет базис $[y_1^0]_{\partial P} + \ker \imath_*^1, \dots, [y_r^0]_{\partial P} + \ker \imath_*^1$. Согласно предложению 6 существует изоморфизм $f : H_1(\partial P)/\ker \imath_*^1 \to H_1(P)$. По доказанному выше он определяется равенствами $f([y_j^0]_{\partial P} + \ker \imath_*^1) = \imath_*^1([y_j^0]_{\partial P})$, $j = 1, \dots, r$. Так как $\imath_*^1([y_j^0]_{\partial P}) = [y_j^0]_P$ для тех же j, то этим доказано, что $[y_1^0]_P, \dots, [y_r^0]_P$ — базис группы $H_1(P)$. В силу (5) и (4) он дуален базису $[\overline{x}_1], \dots, [\overline{x}_r]$ группы $H_2(P, \partial P)$. □

Вычислительная сложность алгоритмов 1 и 2 рассмотрена в конце предыдущего раздела. Алгоритмы 3 и 4 будут применяться к многообразию $Q = \partial P$. Для оценки их эффективности нужны только два параметра: $q = \mathrm{card}\, K^2(\partial P)$ и $r = \mathrm{rank}\, H_1(P) = \mathrm{rank}\, H_2(P, \partial P)$.

На первый шаг алгоритма 3 требуется $O(q)$ элементарных операций. То же верно для коллапсирований, выполняемых на следующем шаге. Построение фундаментальных циклов графа G_k имеет сложность $O(g_k r_k)$, где $g_k = \operatorname{card} K^1(G_k)$ и $r_k = \operatorname{rank} Z_1(G_k) = \operatorname{rank} H_1(G_k)$. Но $g_1+\dots+g_m < \operatorname{card} K^1(\partial P) \le 4q$, а по теореме 3 $r_1+\dots+r_m = r$. Поэтому вычислительная сложность всего алгоритма 3 равна $O(qr)$ в худшем случае.

Для выполнения первых двух шагов алгоритма 4, требуется $O(\operatorname{card} y)$ элементарных операций. Очевидно, что для последнего шага эта величина равна $O(\operatorname{card} x)$. Двумерный путь Y содержит не более q клеток. Поэтому его построение на шагах 3 и 4 имеет сложность $O(q)$. Ребра $b_1, \dots, b_n$ можно найти с помощью $O(n)$ действий, а коцепь J_y на следующем шаге строится посредством $O(q+n)$ операций. Поскольку числа $\operatorname{card} y$ и $\operatorname{card} x$ заведомо меньше, чем $\operatorname{card} K^1(Q)$, $\operatorname{card} K^1(Q) \le 4q$ и $n \le q$, то алгоритм 4 имеет вычислительную сложность $O(q)$.

Очевидно, что последний шаг алгоритма 5 выполняется за $O(r^3)$ элементарных действий. Таким образом, вычисление базиса группы $H_1(P)$, дуального уже найденному базису группы $H_2(P, \partial P)$, имеет сложность $O(qr + r^3)$.

6. Заключение

Вернемся к задаче о взаимодействии движущегося трехмерного тела — ударника P с неподвижной жесткой преградой. Задано кубическое клеточное разбиение тела P (гексаэдрическая сетка конечных элементов). На каждом шаге интегрирования по времени требуется вычислить геометрию деформированного тела и его напряженно-деформированное состояние. Предположим, что ударник имеет сложную топологию. Тогда для решения задачи может быть использована следующая последовательность действий.

1. С помощью алгоритмов 1–5 построим базисы $[\overline{x}_1], \dots, [\overline{x}_r]$ и $[y_1], \dots, [y_r]$ групп гомологий $H_2(P, \partial P)$ и $H_1(P)$ соответственно, дуальные относительно формы пересечения $\operatorname{Ind} : H_2(P, \partial P) \times H_1(P) \to \mathbb{Z}_2$.

2. Вычисляя количество ребер, из которых состоит каждый цикл y_i, найдем элементы базиса, не входящие в ядро $\ker f_*$. Пусть для определенности $f_*[y_i] = f(y_i) = 1$ для всех $i = 1, \dots, k$ и $f_*[y_j] = f(y_j) = 0$ для $j = k+1, \dots, r$.

3. Выполнив преобразования вдоль относительных циклов $[\overline{x}_1], \dots, [\overline{x}_k]$, описанные в разделе 3, получим новое клеточное разбиение тела P, для которого препятствие к построению ажурной сетки равно нулю.

4. Решим исходную задачу с помощью ажурной вычислительной схемы, разработанной в [8]–[11].

Отметим, что в топологических алгоритмах 1–5 используются действия со списками, а также матрицами, состоящими из элементов поля $\mathbb{Z}_2$, причем размеры матриц значительно меньше количества узлов исходной сетки. Поэтому для реализации пп. 1–3 потребуется во много раз меньше времени, чем для решения основной задачи из п. 4. Следовательно, на преимущества в использовании ажурной вычислительной схемы эти дополнительные шаги существенного отрицательного влияния оказать не могут. Кроме того, необходимо учитывать, что коррекцию сетки достаточно выполнить один раз, а основную задачу затем можно решать на ней многократно для различных физических характеристик ударника P.

Ажурная схема может быть полезной не только в рассмотренной задаче об ударнике, но и в любой вычислительной задаче механики сплошной среды, в которой используется метод конечных элементов. Как следствие сказанное верно и для результатов данной работы.

Литература

[1] Lapteva A.V., Yakovlev E.I. *Index vector-function and minimal cycles*, Lobachevskii J. Math. **22**, 35–46 (2006).

[2] Guskov I., Wood Z.J. *Topological noise removal*, Graphics Interface Proceedings, 19–26 (2001).

[3] Wood Z.J., Hoppe H., Desbrun M., Shroder P. *Removing excess topology from isosurfaces*, ACM Transactions on graphics **23** (2), 190–208 (2004).
[4] Lapteva A.V., Yakovlev E.I. *Minimal* 1*-cycles generating a canonical basis of* 2*-manifold's homology group*, Internat. J. Pure and Appl. Math. **31** (4), 555–570 (2006).
[5] Ghrist R., Muhammad A. *Coverage and hole-detection in sensor networks via homology*, Proc. 4th internat. symposium on Information processing in sensor networks, IEEE Press, 254–260 (2005).
[6] De Silva V., Glirist R. *Homological sensor networks*, Notices Amer. Math. Soc. **54** (1), 10–17 (2007).
[7] Базайкин Я.В., Байков В.А., Тайманов И.А., Яковлев А.А. *Численный анализ топологических характеристик трехмерных геологических моделей нефтегазовых месторождений*, Матем. моделирование **25** (10), 19–31 (2013).
[8] Чекмарев Д.Т. *Численные схемы метода конечного элемента на "ажурных" сетках*, Вопросы атомной науки и техн. Сер. Матем. моделирование физич. процессов, вып. 2, 49–54 (2009).
[9] Spirin S.V., Chekmarev D.T., Zhidkov A.V. *Solving the* 3*D elasticity problems by rare mesh FEM scheme*, Finite Diff. Methods, Theory and Appl., V. **9045** of the ser. Lect. Notes in Comput. Sci., 379–384 (2015).
[10] Чекмарев Д.Т., Жидков А.В., Зефиров С.В., Крутова К.А., Спирин С.В. *Численное решение трехмерных задач теории упругости и пластичности с использованием ажурных вариационно-разностных и КЭ схем*, XI Всероссийск. съезд по фундаментальным пробл. теор. и прикл. механ., 20–24 августа 2015 г., г. Казань: сб. докл., 4048–4050 (Изд-во КФУ, Казань, 2015).
[11] Чекмарев Д.Т., Крутова К.А. *Об одном свойстве гексаэдральных сеток как графов*, Образование, наука и эконом. в вузах и школах. Интеграция в междунар. образовательное пространство: Тр. Международн. научн. конф., 28 сентября–2 октября 2015 г., Армения, Горис, Т. I, 98–101 (Изд-во РУДН, Москва, 2015).
[12] Reese S., Wriggers P. *A stabilization technique to avoid hourglassing in finite elasticity*, Int. J. Num. Meth. Engrg. **48**, 79–109 (2000).
[13] Голованов А.И., Корнишин М.С. *Введение в метод конечных элементов статики тонких оболочек* (Изд-во КФТИ, Казань, 1990).
[14] Крутова К.А. *Численное решение трехмерных динамических задач теории упругости и пластичности на основе ажурной вариационно-разностной схемы*, Дисс. ... канд. физ.-матем. наук (ННГУ, Нижний Новгород, 2015).
[15] Жидков А.В., Крутова К.А., Миронов А.А., Чекмарев Д.Т. *Численное решение трехмерных динамических упругопластических задач с использованием ажурной схемы метода конечных элементов*, Пробл. прочности и пластичности **79** (3), 327–337 (2017).
[16] Зейферт Г., Трельфалль В. *Топология* (РХД, Ижевск, 2001).
[17] Дольд А. *Лекции по алгебраической топологии* (Мир, М., 1976).
[18] Дубровин Б.А., Новиков С.П., Фоменко А.Т. *Современная геометрия. Методы теории гомологий* (Наука, М., 1984).
[19] Яковлев Е.И. *Вычислительная топология* (Изд-во ННГУ, Нижний Новгород, 2005).
[20] Новиков Ф.А. *Дискретная математика для программистов* (Изд-во Питер, СПб., 2000).
[21] Яковлев Е.И., Ценова А.А. *Алгоритм вычисления базисов групп двумерных гомологий разветвленных триангулированных поверхностей*, Тр. Нижегородск. гос. техн. ун-та им. Р.Е. Алексеева, № 2 (95), 331—338 (2012).
[22] Edelsbrunner H., Harer J.L. *Computational topology. An introduction* (AMS, 2010).

Евгений Иванович Яковлев

Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, ул. Б. Печерская, д. 25/12, г. Нижний Новгород, 630155, Россия,

`e-mail:` eyakovlev@hse.ru

Дмитрий Тимофеевич Чекмарев

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, пр. Гагарина, д. 23, г. Нижний Новгород, 603950, Россия,

`e-mail:` 4ekm@mm.unn.ru

E.I. Yakovlev and D.T. Chekmarev

Topological methods in one numerical scheme of solving three-dimensional continuum mechanics problems

Abstract. We discuss finite element numerical schemes for solving the continuum mechanics problems. Previously a method of acceleration of calculations was developed which uses the simplicial mesh inscribed in the original cubic cell partition of a three-dimensional body. In this work we show that the obstacle to the construction of this design may be described in terms of homology groups modulo 2. The main goal of the work is to develop a method of removing this obstacle. The achievement of the goal is based on efficient algorithms for computing bases of the homology groups which are dual with respect to the intersection form.

Keywords: computational topology, polyhedron, cell complex, homology group, manifold, intersection form, continuum mechanics, finite element method.

Evgenii Ivanovich Yakovlev

National Research University Higher School of Economics,
25/12 Bol'shaya Pecherskaya str., Nizhny Novgorod, 603155 Russia,

`e-mail:` eyakovlev@hse.ru

Dmitry Timofeevich Chekmarev

Nizhny Novgorod State University,
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950 Russia,

`e-mail:` 4ekm@mm.unn.ru